

GCxGC-HRTOFMSを用いたアロマオイル分析 ー F1イオン化法によるジオール及びトリオール化合物の分子イオン検出ー

関連製品:質量分析計(MS)

【はじめに】

今回、GC×GC-HRTOFMSシステムを用いて、アロマオイルの一種であるTea Tree Oilの分析を行った。イオン化法は、EI法に加えてソフトイオン化法であるFI法も用いた。EI法や代表的なソフトイオン化法であるCI法では分子イオン検出が困難なジオール及びトリオール化合物について、FI法を用いることで分子イオンを確認することが出来たので報告する。

【測定方法】

測定条件を Table 1 に示す。試料は、市販の Tea Tree Oil をそのまま使用した。

【結果】

Fig. 1に、EI法で得られた2D TICクロマトグラムを示す。2D TICクロマトグラム上には、NISTライブラリーデータベース検索によって定性した化合物名と構造を示した。今回のカラムセットでは、1stカラムに微極性、2ndカラムに極性カラムを使用しており、横軸方向は沸点順、縦軸方向は極性順で、それぞれの成分が溶出する。

横軸の保持時間12分から30分にかけて、環式及び非環式モノテルペン類、そしてモノテルペンアルコール類がそれぞれグループ別に観測出来た。また、25分～35分にかけては、環式セスキテルペン類及び環式セスキテルペンアルコール類がそれぞれ観測出来た。

Table 1 Measurement condition

Instrument	AccuTOF™ GC series
	KT2006 thermal modulator (ZOEX)
1st column	BPX5(Trajan SGE社製), 30m x 0.25mm, 0.25μm
2nd column	BPX50(Trajan SGE社製), 2m x 0.1mm, 0.1μm
Modulator period	4 sec
Inlet mode	Split200:1, 0.2μL
Oven temperature	50°C(3min) -> 5°C/min -> 270°C(8min)
Ionization mode	El+ (70eV, 300μA)/ FI+ (8mA, 5msec)
<i>m/z</i> range	<i>m/z</i> 35-600
Spectrum recording speed	50 spectra/sec

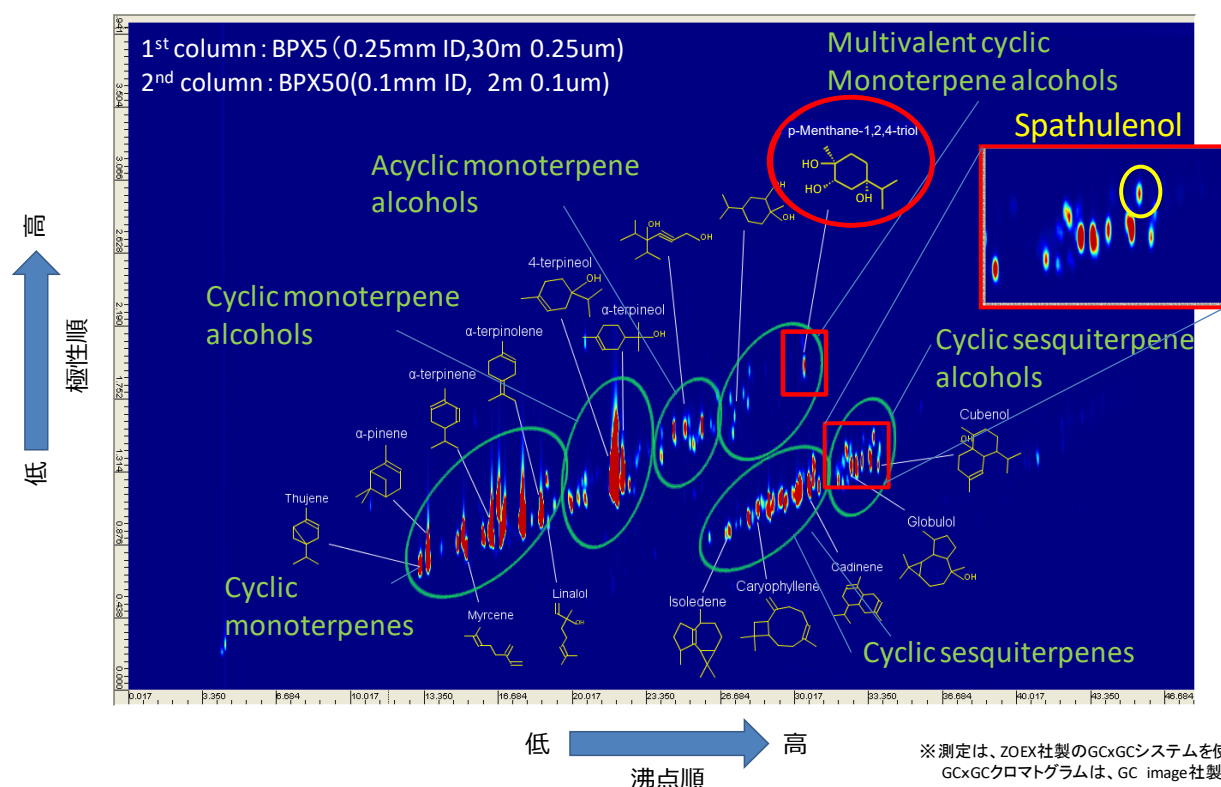


Fig. 1 GCxGC/EI TIC chromatogram

Fig.2に、EI法に加えてFI法で得られた2D TICクロマトグラムを示す。EI法及びFI法共に相関のとれた良好な2D Mapが得られた。この2D Mapより、横軸の保持時間21分から30分の範囲で、また縦軸の保持時間1.2秒から2.0秒にかけてテルペン系のジオール化合物群が検出されていることが分かった。また、横軸30.4分、縦軸2.06秒のところに、トリオール化合物も検出されていた。

Fig.3にジオール化合物、Fig.4にトリオール化合物のマススペクトルの例を示す。EI法では分子イオンが検出しづらい化合物でも、FI法で測定することで、分子イオンが明瞭に検出できることが確認された。また、FI法によるマススペクトルで検出された各分子イオンの精密質量から、組成推定を行った結果、テルペン系のジオール及びトリオール化合物の分子組成を示唆する良好な結果が得られた。

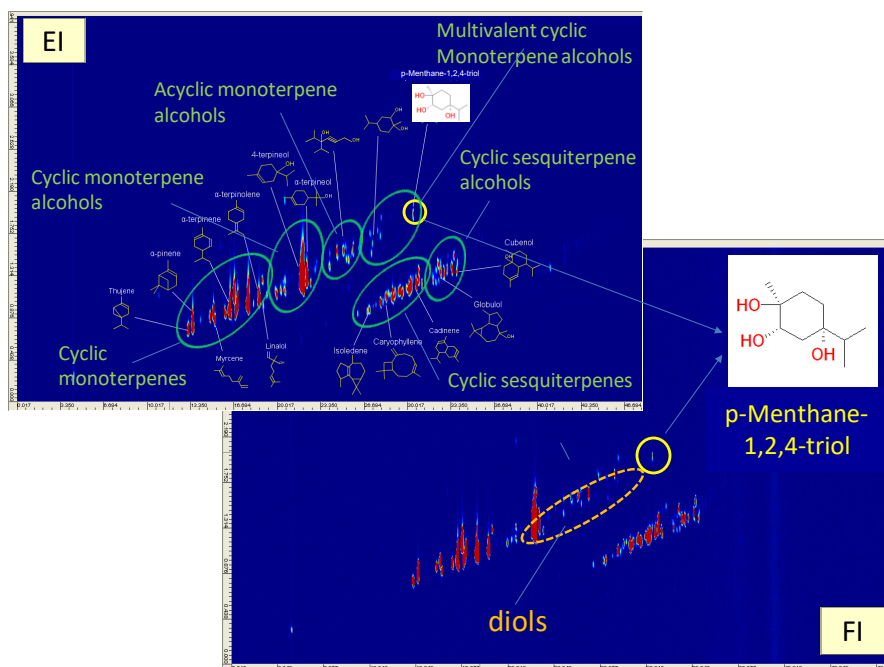


Fig. 2 GCxGC/EI and GCxGC/FI TIC chromatograms

EIマススペクトルを用いたNISTライブラリーデータベース検索による成分同定に加えて、ソフトイオン化法FI法を用いて分子イオンを確認をすることで、より確度の高い定性分析を行うことが可能となる。

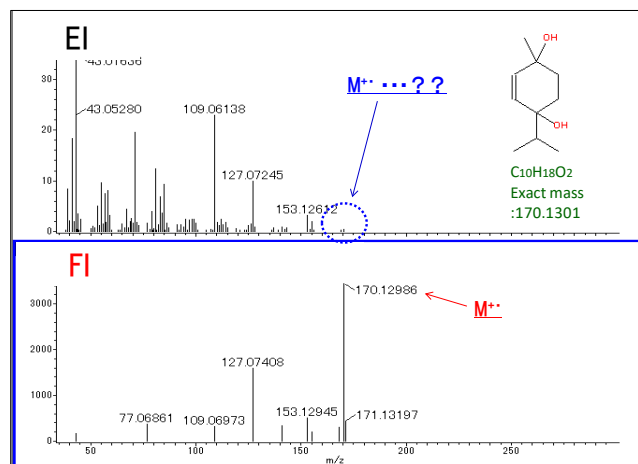


Fig. 3 EI and FI mass spectra of a diol compound

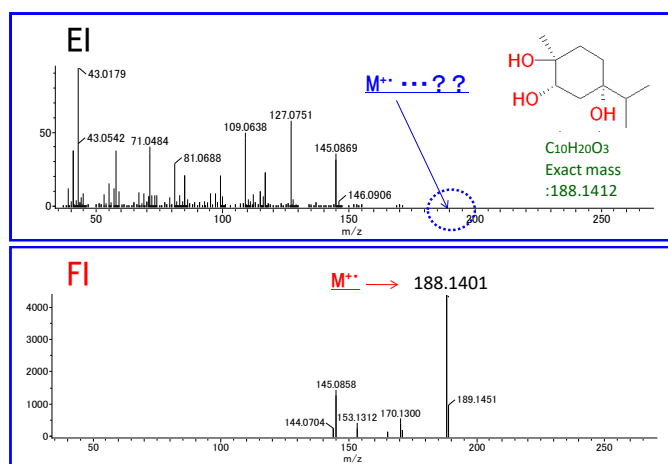


Fig. 4 EI and FI mass spectra of a triol compound

本誌の記載内容は予告なしに変更することがあります。
このカタログに掲載した商品は、外国為替及び外国貿易法の安全輸出入管理の規制品に該当する場合がありますので、輸出するとき、または日本国外に持ち出すときは当社までお問い合わせ下さい。

Copyright(C)2016 JEOL Ltd. All Rights Reserved.

JEOL 日本電子株式会社

本社・昭島製作所

〒196-8558 東京都昭島市武蔵野3-1-2 TEL: (042) 543-1111(大代表) FAX: (042) 546-3353
www.jeol.co.jp ISO 9001・ISO 14001 認証取得

東京事務所 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル13階
営業企画室 TEL: 03-6262-3560 FAX: 03-6262-3577
EO営業推進室 TEL: 03-6262-3567 AI営業推進室 TEL: 03-6262-3568
産業機器営業部 TEL: 03-6262-3570 MEソリューション販促室 TEL: 03-6262-3571
東京支店 〒100-0004 東京都千代田区大手町2丁目1番1号 大手町野村ビル18階 TEL: 03-6262-3580 FAX: 03-6262-3588
東京 SI1グループ TEL: 03-6262-3581 東京 SI2グループ TEL: 03-6262-3582
東京 SI3グループ TEL: 03-6262-5586 ME営業グループ TEL: 03-6262-3583
東京第二事務所 〒190-0012 東京都立川市曙町2丁目8番3号 新鈴倉ビル9階
SE営業部 TEL: 042-528-3491 ソリューションビジネス部 TEL: 042-526-5098
横浜事務所 〒222-0033 神奈川県横浜市港北区新横浜3丁目6番4号 新横浜千歳観光ビル6階 TEL: 045-474-2181 FAX: 045-474-2180
海外事務所・営業所 Boston, Paris, London, Amsterdam, Stockholm, Sydney, Milan, Singapore, Munich, Beijing, Moscow, Sao Paulo ほか

札幌支店 〒060-0809 北海道札幌市北区北9条西3丁目19番地 ノルテプラザ5階 TEL: 011-726-9680 FAX: 011-717-7305
仙台支店 〒980-0021 宮城県仙台市青葉区中央2丁目2番1号 仙台三菱ビル6階 TEL: 022-222-3324 FAX: 022-265-0202
筑波支店 〒305-0033 茨城県つくば市東新井18番1号 TEL: 029-856-3220 FAX: 029-856-1639
名古屋支店 〒450-0001 愛知県名古屋市中村区那古野1丁目47番1号 名古屋国際センタービル14階 TEL: 052-581-1406 FAX: 052-581-2897
大阪支店 〒532-0011 大阪府大阪市淀川区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル11階 TEL: 06-6304-3941 FAX: 06-6304-7377
西日本ソリューションセンター
〒532-0011 大阪府大阪市淀川区西中島5丁目14番5号 ニッセイ新大阪南口ビル11階 TEL: 06-6305-0121 FAX: 06-6305-0105
広島支店 〒730-0015 広島県広島市中区横本町10番6号 広島 NSビル5階 TEL: 082-221-2500 FAX: 082-221-3611
高松支店 〒760-0023 香川県高松市南町1-1-12 パシフィックシティ高松5階 TEL: 087-821-0053 FAX: 087-822-0709
福岡支店 〒812-0011 福岡市博多区博多駅前2丁目1番1号 福岡朝日ビル5階 TEL: 092-411-2381 FAX: 092-473-1649